

Ассоциация студентов-физиков и молодых учёных России
Национальный исследовательский Томский государственный университет
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Томский университет систем управления и радиоэлектроники
Томский государственный педагогический университет
Томский научный центр СО РАН
Институт сильноточной электроники СО РАН
Институт оптики атмосферы СО РАН
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН
Институт мониторинга климатических и экологических систем СО РАН
Институт электрофизики УрО РАН

В Н К С Ф – 24

**Двадцать четвертая Всероссийская
научная конференция студентов-физиков и молодых учёных**



Россия

**Материалы конференции
Информационный бюллетень**

**Томск
2018**

Более тщательная оценка и сравнение результатов степени кристалличности, полученных другими методами (дифференциальная сканирующая калориметрия, рентгеновская дифракция) показывает, что комбинация комбинационного рассеяния света является хорошим альтернативным методом для тестирования кристалличности и механических свойств поликапролактона. Поэтому дальнейшая работа в рамках исследования будет направлена на корреляцию кристалличности и механических свойств волокон поликапролактона, полученных различными методами.

Авторы благодарят И. Н. Лапина из Томского государственного университета, Россия, за выполнение измерений с длинами волн 785 и 405 нм.

текст публикаций:

Mon, F., Rouais, L., Trui, C., Baquey, J.R., Monties, P., Havlik, TiN coating: surface characterization and haemocompatibility. *Materials*. 14 (1993) 169–176. doi:10.1016/0142-9612(93)90019-X.

†, Bolbasov, P.V., Maryin, K.S., Stankevich, A.I., Kozelskaya, E.V., Shesterikov, V.I., Khodyrevskaya, M.V., Nasonova, D.K., Zova, Y.A., Kudryavtseva, Y.G., Anissimov, S.I., Tverdokhlebov, Surface modification of electrospun poly-(l-lactic) acid scaffolds сlive magnetron sputtering, *Colloids Surfaces B Biointerfaces*. 162 (2017) 43–51. doi:10.1016/j.colsurfb.2017.11.028.

Wang, H., Zhao, L.-S., Turng, Q., Li, Crystalline Morphology of Electrospun Poly(ϵ -caprolactone) (PCL) Nanofibers, *Ind. Eng. Res.* 52 (2013) 4939–4949. doi:10.1021/ie302185e.

Теоретическое исследование фотофизических процессов, протекающих в фурукумарилах

Бочарникова Елена Николаевна

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Брянцева Наталья Геннадьевна, Чайковская Ольга Николаевна

bocharnikova.2010@mail.ru

Псоралены (фурукумарины) – соединения растительного происхождения. Они фотохимически активны и в комбинации с длинноволновым ультрафиолетом излучением (320 – 400 нм) используются для лечения многих кожных и аутоиммунных заболеваний, они успешно используются для лечения псориаза и аутоиммунных заболеваний с помощью ПУВА-терапии и фотофореза. Большинство работ, посвященных исследованиям химии псораленов, связаны с изучением их фотореакций с биологическими субстратами, а также идентификации фотопродуктов, образующихся при облучении в водных и спиртовых средах. Механизмы реакций, которые очень важны в ПУВА-терапии, включают в себя быстрые реакции с переносом заряда и стадийные процессы фотоокисления [1]. Более подробные данные о фотофизических процессах, протекающих в молекулах, можно получить из квантово-химического расчета.

Целью данной работы стало теоретическое исследование фотофизических процессов, протекающих в 8-эксипсоралене (8-МОП) и хеллипе (Хл). Структурные формулы молекул приведены на рис. 1.

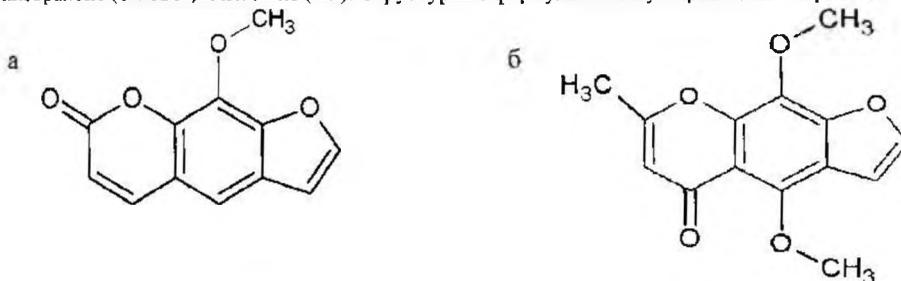


рис. 1. Структурные формулы исследуемых молекул: 8-метоксипсорален(а) и хеллип (б)

Метод квантовой химии используется для изучения фотофизических свойств линейных и угловых молекул с сопряженными внешними карбонильными заместителями. Основой нашего теоретического подхода являются концепции и методы квантовой химии и теория безызлучательных переходов в многоатомных органических молекулах. Квантово-химические алгоритмы и программы основаны на полуэмпирическом методе частичного пренебрежения дифференциальным перекрытием спектров спектроскопической параметризацией (ЧПДП/С). Компьютерная программа, разработанная для расчета матричных элементов оператора спин-орбитального взаимодействия, позволяет оценить внутреннее

преобразование энергии возбуждения в молекуле и скорость синглет-триплетного преобразования k_{ST} формуле [2]:

$$k_{ST} \approx 10^{10} |\beta_{ST}|^2 / (\exp n!)$$

где k_{ST} – константа интеркомбинационной конверсии, $|\beta_{ST}|^2$ – спин-орбитальное взаимодействие электронных состояний с учетом их орбитальной симметрии, n определяется из условия минимума департиции резонанса начального и конечного состояний электронного перехода.

Расчитанные константы фотофизических процессов и силы осциллятора нижних синглетных возбужденных состояний методом ЧПДПС приведены в таблице 1.

Важной характеристикой флуоресценции молекул в растворе является квантовый выход. Для синглетных состояний, при их прямом оптическом заселении, квантовый выход флуоресценции определяется выражением

$$\psi_f = \frac{k_r}{k_r + k_{IC} + k_{ST}}$$

где k_r – константа радиационного распада, k_{IC} – константа внутренней конверсии, k_{ST} – константа интеркомбинационной конверсии.

Квантово-химические расчеты методом ЧПДПС были выполнены для определения фотофизических процессов в молекулах псоралена. Было показано, что для всех соединений нижнее синглетное возбужденное состояние S_1 представляет собой тип $\pi\pi^*$ и состояние S_2 – $n\pi^*$.

| Соединение | Метод | | | | | |
|------------|------------------|------------------|------------------|------------------|-------------------|------------------|
| | AM1 | | | PM3 | | |
| | k_r | k_{IC} | k_{ST} | k_r | k_{IC} | k_{ST} |
| 8-МОП | $5.7 \cdot 10^7$ | $5.8 \cdot 10^3$ | $8.6 \cdot 10^7$ | $8 \cdot 10^7$ | $5 \cdot 10^3$ | $2.5 \cdot 10^7$ |
| Хеллин | $1.2 \cdot 10^7$ | $5.5 \cdot 10^2$ | $7.3 \cdot 10^2$ | $2.4 \cdot 10^9$ | $1.03 \cdot 10^3$ | $3.5 \cdot 10^4$ |

Экспериментальные данные были получены на спектрофлуориметре SM-2203 при комнатной температуре в этаноле. Они показали, что для исследуемых молекул значения квантовых выходов флуоресценции зависят от растворителя.

Из анализа расчетных и экспериментальных данных можно предположить, что метоксигруппы оказывают наиболее сильное влияние на спектрально-люминесцентные характеристики исследуемых молекул. Наблюдаемое для исследуемых соединений эффективное межсистемное преобразование с высокой константой скорости $\sim 10^7 \text{ s}^{-1}$ для 8-МОП и низкой константой скорости $\sim 10^2\text{-}10^4 \text{ s}^{-1}$ для хеллина. Установлено, что молекулы и эффективные популяции триплетов обусловлены близким расположением слоев с различной орбитальной природой, что приводит к небольшим значениям квантовых выходов флуоресценции.

Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России проект № 4.6027.2017/8.9

Список публикаций:

- [1] Ковальская И.Е., Соколова И.В., Майер Г.В., «Зависимость флуоресцентной способности к эффективно межсистемного преобразования в псораленах», *Journal of Fluorescence* 13, 5-7 (2003).
- [2] Артюхов В.Я., Помохов В.А., «Природа электронно-возбужденных состояний органических соединений и процессы безызлучательной конверсии», журнал «Российская физика» 59 (4), 525-535 (2016).